



TITLE:

吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討

AUTHOR(S):

鈴木, 哲夫

CITATION:

鈴木, 哲夫. 吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2020, 2019: 43-43

ISSUE DATE:

2020-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/251123>

RIGHT:

吸着工学・乾燥工学等に関する分子論的検討

Theoretical Studies on Microscopic Problems in Separation Engineering and Drying

京都大学 大学院 工学研究科 化学工学専攻 分離工学分野 鈴木哲夫

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、吸着工学、乾燥工学、食品工学などの種々のプロセスに関連する物理化学的な諸問題を取り上げ、分子軌道法や分子動力学法などの計算機化学的手法を用いて検討を行うことを目的としている。今年度はアガロオリゴ糖の水和状態を分子動力学(MD)シミュレーションにより検討した。以下その概要を報告する。

糖鎖高分子であるアガロースは、寒天の主要成分であり、食品や電気泳動用支持体に用いられている。そのアガロースを低分子化して得られるアガロオリゴ糖は、抗炎症作用、発がん予防作用などの固有の性質が報告されており、機能性食品への応用が期待されるユニークなオリゴ糖である。本研究では、食品工学、生化学などで有用な基礎的知見を得ることを目的として、MD 計算を用いてアガロオリゴ糖の水和状態を調べた。比較のため、トレハロースについても同様の計算を実施した。

MD 計算には Amber14 を用いた。糖残基数 2 のアガロオリゴ糖とトレハロースについて、糖 6 個、濃度 0.6, 1.8 wt% の場合を取り上げた。糖の初期配置は、濃度 0.6, 1.8 wt% の各場合について、原点からの距離がそれぞれ 20, 14 Å のデカルト座標軸上の点において糖が単独で水和した状態とした。基本セルに配置した水分子の個数は、濃度 0.6, 1.8 wt% に対してそれぞれ 17100 個、5700 個だった。それらの基本セルを用いて、圧力 1 atm、温度 25, 75°C の NPT アンサンブル MD 計算を行った。6 個の糖の会合状態について、任意の 2 つの糖の重心間距離などを調べ、糖の動的挙動について検討した。

MD 計算の結果から、アガロオリゴ糖とトレハロースの動的挙動を検討した。一例として、糖濃度 1.8wt%、75°C の場合の結果を記す。各糖に対し、ある 1 つの糖に着目し、その糖と他の糖との重心間距離の経時変化を調べた。重心間距離の最短値が約 3.6 Å であること、重心間距離が 7 Å 以下では糖が会合しているとみなすと、トレハロースの方が会合するのべ時間が長いこと、がわかった。同様の検討を、6 個の糖の重心間距離全ての組み合わせ 15 通りに対して行った。その結果、200 ns の期間中に全ての糖が会合して 1 個のクラスタを形成するのべ時間は、アガロオリゴ糖は 34.7 ns、トレハロースは 85.1 ns だった。トレハロースの方がのべ時間が長い原因として、トレハロースの方が OH 基が多いため、糖間水素結合数が多く、会合状態から解離しづらいことが考えられる。同様の検討を濃度や温度が異なる場合についても行った。濃度 0.6 wt%、温度 75°C の場合、全ての糖が 1 個のクラスタを形成するのべ時間は、アガロオリゴ糖は 0.0 ns、トレハロースは 6.2 ns となり、6 個の糖全てが会合することはほとんどなかった。